



**UNIVERSIDADE FEDERAL FRONTEIRA SUL**

**CAMPUS CHAPECÓ**

**LICENCIATURA EM MATEMÁTICA**

**ACACIO NECKEL**

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM SISTEMA DE**

**BIORREATORES**

**CHAPECÓ**

**2018**

**ACACIO NECKEL**

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM SISTEMA DE  
BIORREATORES**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao curso de Licenciatura em Matemática da Universidade Federal da Fronteira Sul, como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Pedro Augusto Pereira Borges

**CHAPECÓ**

**2018**

**PROGRAD/DBIB - Divisão de Bibliotecas**

Neckel, Acacio  
MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM SISTEMA DE BIORREADORES/  
Acacio Neckel. -- 2018.  
36 f.

Orientador: Pedro Augusto Pereira Borges.  
Trabalho de conclusão de curso (graduação) -  
Universidade Federal da Fronteira Sul, Curso de  
Licenciatura em Matemática, Chapecó, SC, 2018.

1. Modelagem Matemática. 2. Reatores. 3. Simulação.  
4. Taxa de Reação. I. Borges, Pedro Augusto Pereira,  
orient. II. Universidade Federal da Fronteira Sul. III.  
Título.

ACACIO NECKEL

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM SISTEMA DE  
BIORREATORES**

Trabalho de conclusão de curso de graduação apresentado como requisito para obtenção de grau de Licenciando em Matemática da Universidade Federal da Fronteira Sul.

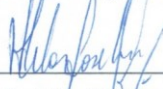
Orientador: Prof. Dr. Pedro Augusto Pereira Borges

Este trabalho de conclusão de curso foi defendido e aprovado pela banca em: 01/03/18

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Pedro Augusto Pereira Borges



Prof. Dr. Vitor José Petry



Prof. Dr. Milton Kist

## **AGRADECIMENTOS**

Ao professor Pedro Augusto Pereira Borges, pela orientação, ensinamentos, paciência, dedicação e colaboração no desenvolvimento deste trabalho.

À minha família, pelo apoio durante a graduação.

Aos professores da Universidade Federal Fronteira Sul, pelos ensinamentos na trajetória do curso.

Aos professores que organizaram e implantaram o curso de Licenciatura em Matemática.

À UFFS por disponibilizar o curso.

À Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação do Estado de Santa Catarina (FAPESC), pelo auxílio no pagamentos da bolsa de pesquisa.

## RESUMO

O tratamento de esgoto é assunto de políticas públicas. Esse serviço, quando disponibilizado para a população, pode evitar a transmissão de doenças. A modelagem matemática de reatores tem se mostrado um recurso técnico, que permite estimar parâmetros e simular o funcionamento de sistemas com custo reduzido, em relação aos modelos experimentais. O objetivo do presente trabalho é simular as variações da concentração de matéria orgânica (DBO) em um sistema composto por dois biorreatores acoplados em série (um anaeróbio e outro do tipo *wetlands*) em função do tempo. O problema foi modelado considerando ambos os reatores como de mistura completa, através de um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, cujas condições de fronteira são as cargas de entrada e saída. A taxa de reação em ambos os reatores foi simulada como uma função constante – conforme sugere a literatura - e variável, considerando três tipos de funções: função afim, exponencial e logarítmica. Os parâmetros do modelo foram obtidos resolvendo o problema inverso, através do Método de Procura em Rede, tendo como base dados experimentais disponíveis na literatura. As simulações mostraram que, apesar da forte dispersão das medidas experimentais de DBO, ocasionadas por fatores não modelados (tais como chuva e temperatura), as taxas de reação expressas com as funções afim e logarítmica apresentaram curva de DBO mais compatíveis com os dados experimentais, do que as outras funções testadas.

Palavras chave: Modelagem Matemática, Reatores, Simulação, Taxa de Reação.

## ABSTRACT

Sewage treatment is a subject of public policy. This service, when available to the population, can prevent the transmission of diseases. The mathematical modeling of reactors has proven to be a technical resource that permits the estimation of parameters and that simulates system operations at a reduced cost in relation to the experimental models. The objective of this present work is to simulate the variations of organic matter concentration (BOD) in a system composed of two bioreactors coupled in a series (one anaerobic and the other a wetlands type) as a matter of time. The problem was modeled considering both reactors as a complete mixture, through a system of first order ordinary differential equations, whose boundary conditions are the input and output loads. The reaction rate in both reactors was simulated as a constant function - as suggested by the literature - and variable, considering three types of functions: affine, exponential and logarithmic function. The parameters of the model were obtained by solving the inverse problem through the Network Search Method, based on experimental data available in the literature. The simulations showed that, in spite of the strong dispersion of experimental measures of the BOD caused by non-modeled factors (such as rainfall and temperature), the reaction rates expressed with the affine and logarithmic functions presented a BOD curve which was more compatible with the experimental data, than with the other functions that were tested.

**Keywords:** Mathematical Modeling, Reactors, Simulation, Reaction Rate.

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO.....</b>	<b>8</b>
<b>2. REFERÊNCIAL TEÓRICO .....</b>	<b>10</b>
<b>3. METODOLOGIA.....</b>	<b>14</b>
<b>4. DADOS EXPERIMENTAIS.....</b>	<b>16</b>
<b>5. MODELO MATEMÁTICO E SOLUÇÃO NUMÉRICA .....</b>	<b>19</b>
5.1 MODELO MATEMÁTICO.....	19
5.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	22
<b>6. ANÁLISE DA APLICAÇÃO DO MODELO .....</b>	<b>27</b>
6.1 SOBRE O PROBLEMA INVERSO.....	27
6.2 SOBRE A EFICIÊNCIA DO MODELO PARA PREDIZER OS DADOS EXPERIMENTAIS.....	27
<b>7. CONSIDERAÇÕES FINAIS .....</b>	<b>33</b>
<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>34</b>



## 1. INTRODUÇÃO

O descarte de esgoto doméstico com tratamentos precários representa um dos principais fatores de contaminação do solo, lagoas, riachos, rios e oceanos, ocasionando problemas de saúde pública, tais como as infecções por doenças parasitárias e intestinais. O esforço para minimizar os danos desse descarte passa necessariamente pela pesquisa de métodos de tratamento de águas residuais.

Assim, uma das preocupações das políticas públicas consiste em disponibilizar tratamento de esgoto (saneamento básico) para a população. Diversos procedimentos técnicos estão envolvidos no sistema de tratamento de esgotos, entre eles a instalação de reatores. A redução do tamanho das estações de tratamento e o custo do tratamento terciário (tratamento para remoção de poluentes tóxicos ou não biodegradáveis), geram a necessidade de melhorar a eficiência dos reatores no tratamento de dejetos.

O desenvolvimento de modelos matemáticos associados a resultados de experimentos em escala laboratorial é uma forma de obter dados sobre o funcionamento de reatores de diferentes tipos, determinar seus parâmetros e avaliar seu rendimento, com baixo custo e maior flexibilidade, em relação à construção de protótipos.

A modelagem matemática “consiste, essencialmente, na arte de transformar situações da realidade em problemas matemáticos cujas soluções devem ser interpretadas na linguagem usual.” (BASSANEZI, 2002, p. 24).

Este trabalho tem como objetivo geral, propor um modelo matemático, para simular o funcionamento de um sistema de tratamento secundário de esgoto com dois reatores acoplados em série: um de mistura completa e outro do tipo *wetlands*.

As seguintes hipóteses foram assumidas na proposição do modelo:

1. O modelo de mistura completa modela satisfatoriamente as reações de ambos os reatores, em termos de variação da Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO);
2. Os parâmetros de rendimento de ambos os reatores variam em função da concentração de matéria orgânica presente nos reatores, em cada instante de tempo.

Os objetivos específicos são:

- Propor modelos matemáticos na forma de um sistema de EDOs (Equações Diferenciais Ordinárias) para a descrição da concentração da DBO em sistemas de reatores;
- Implementar computacionalmente a solução do sistema de EDOs;
- Analisar o desempenho dos modelos na tarefa de descrever as variações da concentração de DBO obtida nos experimentos de (Sezerino (2006));
- Determinar os parâmetros de rendimento do sistema de reatores;
- Utilizar o modelo e os parâmetros obtidos para simular o funcionamento do sistema de reatores sob diferentes condições de carregamento.

## 2. REFERÊNCIAL TEÓRICO

O esgoto é produzido, tanto em residências familiares quanto em indústrias. Algumas dessas empresas possuem tratamento próprio para seus resíduos. Já para as residências familiares, nas cidades, onde há rede de saneamento básico, existe tratamento de esgoto.

A principal fonte de poluição dos esgotos é a matéria orgânica, pois consome oxigênio dissolvido para sua estabilização, em geral é composta por proteínas (40% a 60%), carboidratos (25% a 50%), gordura e óleo (8% a 12%) e ureia, pesticidas, metais e outros (em menor quantidade) (SPERLING, 2005, p. 89).

A degradação da matéria orgânica ocorre por meio da grande população de bactérias presente no esgoto, sendo que as bactérias que consomem matéria orgânica com oxigênio presente na massa líquida, são chamadas de aeróbias. Enquanto as bactérias que consomem a matéria orgânica sem a presença do oxigênio da massa líquida, são chamadas de anaeróbias.

Para medir a quantidade de matéria orgânica presente no esgoto, pode-se utilizar como parâmetro o consumo de oxigênio, dentre os testes, encontra-se o de Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e Demanda Química de Oxigênio (DQO). A principal diferença entre ambas, é que a DBO relaciona-se a uma oxidação bioquímica da matéria orgânica, realizada inteiramente por microrganismos, enquanto que a DQO corresponde a uma oxidação química da matéria orgânica, obtida através de um forte oxidante. (SPERLING, 2005, p. 94).

No processo de tratamento, o afluente é coletado através de uma rede de tubos e canos interligados (rede de coleta) e conduzido até uma Estação de Tratamento de Esgoto (ETE), onde é feito um tratamento preliminar, com procedimentos físicos, como grades e/ou desarenadores (caixa de areia), com o objetivo de retirar sólidos grosseiros e areia.

Na sequência, entra em operação o tratamento primário, com o objetivo de remover sólidos em suspensão sedimentáveis e sólidos flutuantes. Nessa etapa, podem ser utilizados reatores UASB (*Upflow Anaerobic Sludge Blanket*) reator anaeróbio de fluxo ascendente e de manta de lodo, ou para pequenas populações, tanques sépticos. O efluente é depositado no reator, ficando a parte mais densa (lodo) no fundo, enquanto a parte líquida, segue para o tratamento secundário.

De acordo com Sperling (2005):

O principal objetivo do tratamento secundário é a remoção da *matéria orgânica*. Esta se apresenta nas seguintes formas:

- *matéria orgânica dissolvida* (DBO solúvel ou filtrada), a qual não é removida por processos meramente físicos, como o de sedimentação, que ocorre no tratamento primário;
- *matéria orgânica em suspensão* (DBO suspensa ou particulada), a qual é em grande parte removida no eventual tratamento primário, mas cujos sólidos de sedimentabilidade mais lenta persistem na massa líquida. (SPERLING, 2005, p. 273)

Há diferentes procedimentos que podem efetuar o tratamento secundário, sendo os mais comuns: lagoas de estabilização e variantes; processos de disposição sobre o solo; reatores anaeróbios; lodos ativados e variantes e reatores aeróbios com biofilmes.

Após a passagem do esgoto pelo tratamento secundário, o mesmo pode ser lançado em rios, mares e solos, mas também pode receber um pós-tratamento, sendo os mais comuns, aqueles com base no solo: irrigação, infiltração rápida, infiltração subsuperficial e escoamento superficial. Caso a utilização seja com base na água, pode ser utilizado o sistema de terras úmidas construídas (*wetlands*).

Neste trabalho, será destacada a utilização de reatores, que de acordo com Pilloto (2004, p. 43) “denomina-se reator todo tanque ou volume genérico que possibilita o acontecimento de reações químicas ou bioquímicas no seu interior”. Os reatores são classificados de acordo com suas características hidráulicas e de fluxo, há quatro principais modelos:

- Fluxo pistão;
- Mistura completa;
- Fluxo disperso;
- Células em série e/ou paralelo;

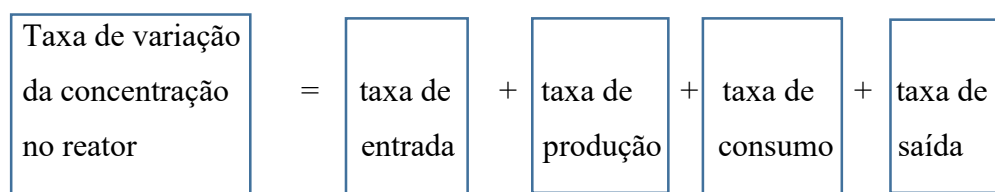
Neste estudo, será pesquisado o funcionamento de um reator de mistura completa, no qual a concentração das substâncias é considerada homogênea, ou seja, a concentração em cada ponto do reator é a mesma e o sistema de digestão será considerado anaeróbio.

Os reatores de mistura completa possuem um bom custo benefício em sua operação, mas pode ser desenvolvido um pós tratamento de seu efluente, pois segundo Sousa *et al.* (2004) os níveis de alguns tipos de nutrientes e organismos patogênicos, precisam ter um novo tratamento antes de serem depositados na natureza. Entre os sistemas utilizados com base no solo ou água para o pós tratamento de esgoto, o reator do tipo *wetlands* mostra-se uma opção significativa, pois apresenta baixo custo de manutenção operacional, não apresenta consumo de energia elétrica e não utiliza produtos químicos, Iaqueli (2016).

*Wetlands* é uma palavra de origem inglesa, que traduzida para o português significa terra úmida. De acordo com Philippi e Sezerino (2004):

“pode ser definido como um ecossistema de transição entre ambientes terrestre e aquáticos. São áreas inundáveis (zonas úmidas) onde inúmeros processos e agentes (animais, plantas, solo, luz solar ...) interagem, recebendo, doando e reciclando nutrientes e matéria orgânica, continuamente. Estes nutrientes, servem de suporte de macro e micro espécie de organismos fotossintetizantes que convertem compostos inorgânicos em compostos orgânicos (biomassa vegetal), utilizada direta ou indiretamente como alimento para animais e microrganismos.” (PHILIPPI; SEZERINO, 2004, p. 14)

Para cada um dos reatores, será considerado o balanço de massa, proposto por Sperling (2007):



Modelado pela equação (1):

$$V \cdot \frac{dC}{dt} = Q \cdot C_0 - Q \cdot C + r_p \cdot V - r_c \cdot V \quad (1)$$

$C$ : concentração da substância ( $mg/l$ );

$C_0$ : concentração inicial ( $mg/l$ );

$Q$ : vazão ( $m^3/dia$ );

$V$ : volume do reator ( $m^3$ );

$r_p$ : taxa de reação de produção de composto ( $mg/l \cdot dia$ );

$r_c$ : taxa de reação de consumo do composto ( $mg/l \cdot dia$ );

$t$ : tempo de detenção do resíduo ( $dia$ ).

Um modelo de balanço de massa para *wetlands*, descrito em Kadlec e Wallace (2008), utiliza uma equação diferencial considerando a área do reator, taxa de evaporação, precipitação fluviométrica, entrada e saída de água, entre outros. A simplificação desse modelo – desconsiderando a evaporação e a precipitação - tornam o modelo semelhante aquele descrito pela equação (1).

Em Borges *et al.* (2018), foi simulado o funcionamento de um reator considerando a taxa reação variável, utilizando uma função polinomial de segundo grau e uma função exponencial. Diante dos resultados, verificou-se que o modelo utilizando a função exponencial, apresentou melhor coeficiente de determinação.

### 3. METODOLOGIA

No presente trabalho, será modelado o balanço de massa de um reator de mistura completa anaeróbio acoplado com um reator do tipo *wetlands*, conforme ilustra a Figura 1.

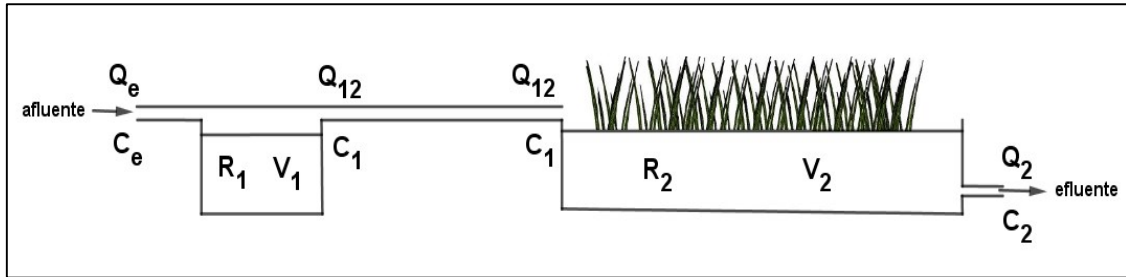


Figura 1 – Sistema de reatores em série: índice 1 e 2 para os reatores  $R_1$  e  $R_2$  respectivamente

Fonte: Elaborado pelo autor

O balanço de massa descrito na equação (1), adaptado para modelar a concentração ( $C$ ) de uma substância que passa pelo sistema de reatores, toma a forma de um sistema de equações ordinárias, apresentado na equação (2):

$$\begin{cases} \frac{V_1 dC_1}{dt} = Q_e C_e - Q_{12} C_1 + r_{p1} V_1 - r_{c1} V_1 \\ \frac{V_2 dC_2}{dt} = Q_{12} C_1 - Q_2 C_2 + r_{p2} V_2 - r_{c2} V_2 \end{cases} \quad (2)$$

Onde:

$Q_e$ : vazão de entrada no reator 1 ( $m^3/dia$ );

$C_e$ : concentração de substância na entrada ( $mg/l$ );

$R_1$ : reator 1;

$V_1$ : volume do reator 1 ( $m^3$ );

$Q_{12}$ : vazão de saída do reator 01 e vazão de entra do reator 2 ( $m^3/dia$ );

$C_1$ : concentração de substância de saída do reator 1 e de entrada do reator 2 ( $mg/l$ );

$r_{p1}$ : taxa de reação de produção de composto no reator 1 ( $mg/l \cdot dia$ );

$r_{c1}$ : taxa de reação de consumo do composto no reator 1 ( $mg/l \cdot dia$ );

$R_2$ : reator 2;

$V_2$ : volume do reator 2 ( $m^3$ );

$Q_2$ : vazão de saída do reator 2 ( $m^3/dia$ );

$C_2$ : concentração da substância de saída do reator 2 ( $mg/l$ );

$r_{p2}$ : taxa de reação de produção de composto no reator 2 ( $mg/l \cdot dia$ );

$r_{c2}$ : taxa de reação de consumo do composto no reator 2 ( $mg/l \cdot dia$ );

$t$ : tempo de detenção do resíduo ( $dia$ ).

Como os coeficientes do sistema da equação (2) podem ser variáveis, as soluções analíticas tornam-se inviáveis, sendo necessária a utilização de métodos numéricos. Neste trabalho, a solução proposta foi obtida utilizando o Método de Runge-Kutta (Barroso *et al.* (1987)), com a respectiva análise de precisão (erro). O software livre SCILAB foi utilizado para a implementação computacional do método de solução.

Pelo problema proposto, foi preciso resolver o problema direto e o problema inverso:

Quanto se deseja encontrar os efeitos resultantes a partir do conhecimento das causas, trata-se de um *Problema Direto*. Por outro lado, quando se deseja encontrar as causas desconhecidas, através de observações dos efeitos desse fenômeno, trata-se de um *Problema Inverso*. (CERVI, 2009, p. 69, grifo do autor)

Ou seja, a partir dos dados do fenômeno da natureza e um modelo matemático proposto, serão determinados os parâmetros que melhor descrevem a situação.



#### 4. DADOS EXPERIMENTAIS

Os dados de Sezerino (2006), referem-se a uma sequência de reatores em série, composta por: lagoa anaeróbia em escala real, lagoa facultativa e *wetlands* em escala piloto, mostrada na Figura 2:



Figura 2 – Sequência de reatores

Fonte: Sezerino (2006)

Os objetivos de Sezerino (2006) são bem mais amplos do que os do presente trabalho:

- aplicar e avaliar o filtro plantado com macrófitas de fluxo horizontal como unidade de polimento de efluente de lagoa facultativa de tratamento secundário de esgotos domésticos, sob condições climáticas do sul do Brasil;
- identificar a potencialidade do filtro plantado na remoção de sólidos suspensos presentes no efluente de lagoas facultativas de tratamento secundário de esgotos domésticos;
- correlacionar as cargas orgânicas afluentes ao filtro plantado com a dinâmica do fluxo hidráulico no maciço filtrante;
- obter parâmetros de dimensionamento e operação para os filtros plantados com macrófitas de fluxo horizontal pós-lagoa facultativa, empregados sob condições de clima subtropical;
- identificar a dinâmica de manejo das macrófitas utilizadas na unidade de tratamento, desde o plantio até a poda. (SEZERINO, 2006, p. 80)

O volume da Lagoa Facultativa (considerado reator 01 neste trabalho) é de 17,48 m<sup>3</sup>, e do *wetlands* (reator 02) 0,6 m<sup>3</sup>. A vazão aplicada semanalmente em ambos foi 5,81 m<sup>3</sup>.

As amostras de efluente a afluente foram realizadas uma vez por semana, no horário das nove horas da manhã, de janeiro de 2004 a junho de 2005.

Em Sezerino (2006) foram medidas diversas variáveis tais como o pH, SS,  $\text{NH}_4\text{-N}$ ,  $\text{PO}_4\text{-P}$  e Coliformes totais. No presente trabalho foram utilizados apenas os dados referentes a DBO, mostrados na Figura 3.

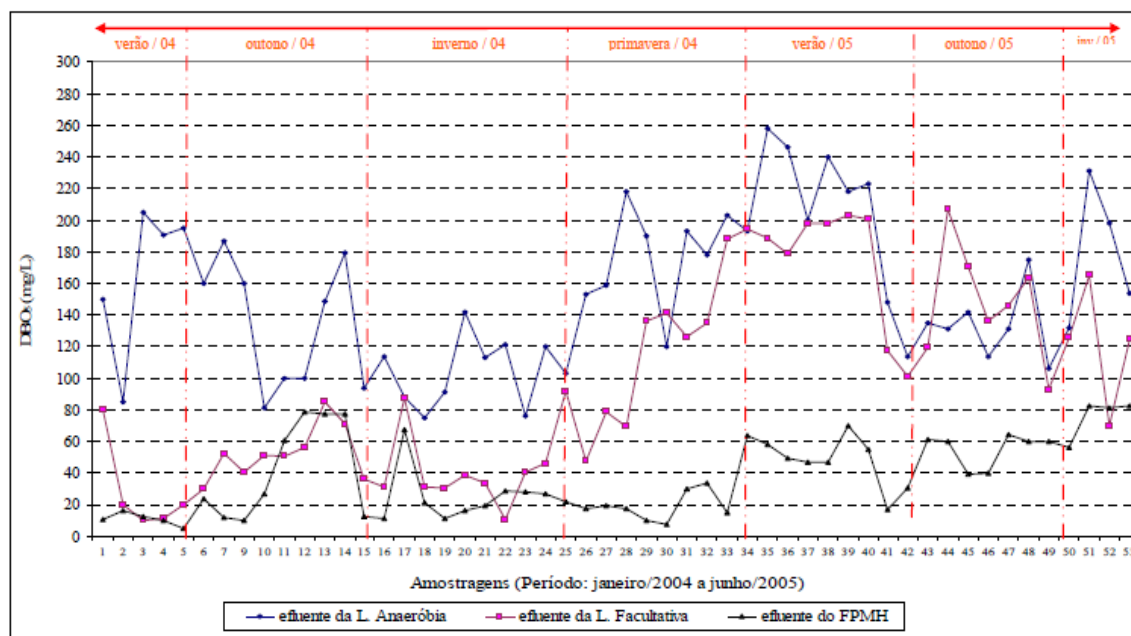


Figura 3 – Dados de DBO

Fonte: Sezerino (2006)

Foram retirados os dados da Figura 3 para trabalhar nos ajustes do modelo matemático proposto, com isso, imprimindo a Figura 3 e utilizando uma escala, foi possível determinar os valores correspondentes a cada intervalo (semana), disponibilizado na Figura 4:

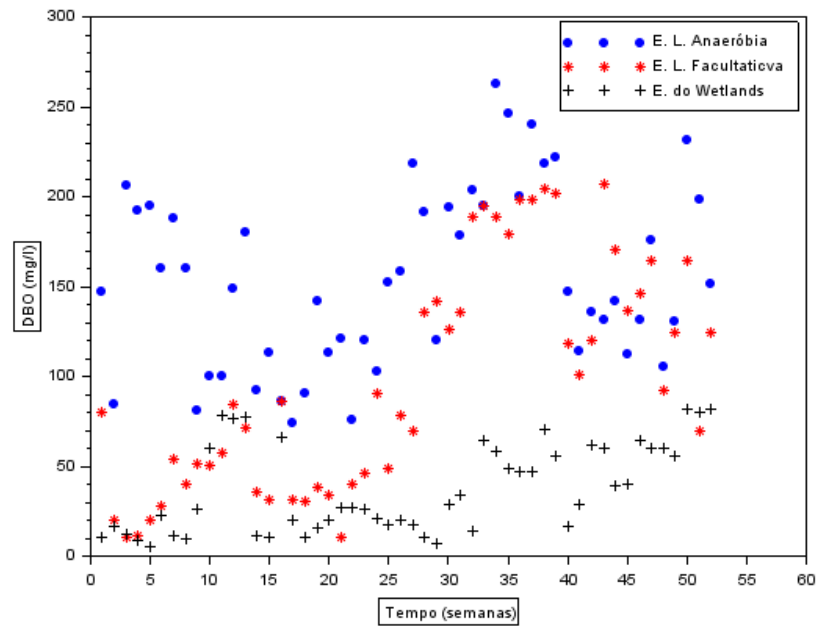


Figura 4 – DBO de entrada e saída do primeiro e segundo reator

Fonte: Adaptado de Sezerino (2006) pelo autor

## 5. MODELO MATEMÁTICO E SOLUÇÃO NUMÉRICA

A discussão do modelo matemático envolve principalmente a função que representa a taxa de reação dos reatores. Para isto, foi simulado o modelo matemático proposto utilizando diferentes funções para representar a taxa de reação. A condição de entrada para o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs), foi ajustada com uma função polinomial do oitavo grau, realizando um ajuste linear.

Na resolução do sistema de EDOs foi utilizado os Métodos Numéricos de Runge-Kutta (RK). Para a determinação dos parâmetros na solução do Problema Inverso (PI) foi adotado o Método de Procura em Rede.

### 5.1 MODELO MATEMÁTICO

O modelo disponível na equação (2) foi reescrito na forma da equação (3), com um termo genérico de reação  $r_i(t) = (r_p - r_c)$ , com  $i = 1, 2$ , já que não são conhecidos os dados experimentais das taxas de reação de produção e consumo de matéria orgânica.

$$\begin{cases} \frac{dC_1}{dt} = \frac{Q_e}{V_1} C_e(t) - \frac{Q_{12}}{V_1} C_1 - r_1(t) \\ \frac{dC_2}{dt} = \frac{Q_{12}}{V_2} C_1 - \frac{Q_2}{V_2} C_2 - r_2(t) \end{cases} \quad (3)$$

Os valores da DBO do efluente da Lagoa Anaeróbia de Sezerino (2006) foram utilizados como valores de entrada, função  $C_e(t)$  na equação (3). Os dados experimentais da DBO referentes ao Efluente da Lagoa Facultativa e da saída do *wetlands*, ambos de Sezerino (2006), foram utilizados neste trabalho, como dados para verificação do modelo, comparados aos valores de DBO calculada na saída dos Reatores 01 e 02, respectivamente.

Para simular o funcionamento do sistema de reatores, foram alteradas as funções  $r_i(t)$  com  $i = 1$  e  $2$ , e determinados seus parâmetros, considerando as seguintes possibilidades:

Função constante: considera que não há variação na taxa de reação.

$$r_i(t) = k_i, \text{ com } k_i \in \mathbb{R} \quad (4)$$

Função afim: considera que a taxa de reação é proporcional à DBO.

$$r_i(t) = a_i C_i + b_i, \text{ com } a_i, b_i \in \mathbb{R} \quad (5)$$

Função exponencial: considera a taxa de reação varia exponencialmente em relação à DBO.

$$r_i(t) = a_i e^{b_i C_i}, \text{ com } a_i, b_i \in \mathbb{R} \quad (6)$$

Função logarítmica: considera que a taxa de reação varia logaritmicamente em relação à DBO.

$$r_i(t) = b_i \log(a_i C_i), \text{ com } a_i, b_i \in \mathbb{R} \quad (7)$$

O modelo matemático proposto refere-se a apenas dois reatores, com isso, os valores de DBO referente a Lagoa Anaeróbia, foram utilizados como condição de entrada de matéria orgânica no primeiro reator, apresentados na Figura 4. Para determinar uma função que simulasse esses dados, foram ajustados os coeficientes de funções polinomiais de diferentes graus.

Para transformar os dados experimentais de entrada em uma função contínua  $C_e(t)$  foi implementado o ajuste dos parâmetros de funções polinomiais, utilizando o Método dos Mínimos Quadrados. Nesse método, considera-se um conjunto de pontos  $(t_p, C_{ep})$  com  $p=1,2,3,\dots,n > 2$  e uma função polinomial de grau  $k$ :

$$C_e(t) = a_0 + a_1 t^1 + a_2 t^2 + \dots + a_k t^k \quad (8)$$

Substituindo os valores de  $t_p$  e  $C_{ep}$ , na equação (8) obtém-se um sistema de equações lineares, onde as incógnitas são os coeficientes  $a_j$ , onde  $j=0,1,2,\dots,k$ , escrito na forma matricial, toma a forma da equação (9).

$$\begin{pmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \dots & t_1^k \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \dots & t_2^k \\ 1 & t_3 & t_3^2 & \dots & t_3^k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & t_p & t_p^2 & \dots & t_p^k \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{e1} \\ C_{e2} \\ C_{e3} \\ \dots \\ C_{ep} \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$\text{Ou } \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{C}_e . \quad (10)$$

Onde  $\mathbf{A}$  é a matriz dos coeficientes,  $\mathbf{x}$  é o vetor das incógnitas e  $\mathbf{C}_e$  o vetor dos termos independentes.

O sistema da equação (10) não tem solução, pois o número de exigências (linhas) é superior ao número de incógnitas, porém multiplicando-o pela matriz transposta de  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{A}^T$ , pode-se torná-lo quadrado e com solução única, pois  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  possui inversa, já que é uma Matriz de Vandermonde, na qual as linhas são linearmente independentes

$$\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{C}_e \quad (11)$$

Multiplicando-se ambos os lados da equação (11) por  $(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})^{-1}$  obtém-se a solução, dada pela equação (12).

$$\mathbf{x} = (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A})^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{C}_e \quad (12)$$

A análise da qualidade do ajuste polinomial foi realizada utilizando o coeficiente de determinação  $R^2$ , (equação 13).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (C_{ei} - \widehat{C}_{ei})^2}{\sum_{i=1}^n (C_{ei} - C_{em})^2} \quad (13)$$

Onde  $C_{em} = \frac{\sum_{p=1}^n C_{ep}}{n}$  o valor médio dos  $C_{ep}$ .

A análise da equação (13) indica que se  $R^2$  é menor e próximo de 1, a razão entre os quadrados das diferenças é próximo de zero e, portanto, a função ajustada descreve a dispersão de pontos.

Foram realizados ajustes com diferentes funções polinomiais, cujos resultados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Coeficientes de determinação de acordo com o grau do polinômio

Grau	4	5	6	7	8	10
$R^2$	0,2329	0,5157	0,5207	0,5381	0,6012	0,6076

Fonte: Elaborado pelo autor

Como mostra a Tabela 1, não houve melhoras significativas no coeficiente de determinação a partir do oitavo grau, o que justifica a escolha da (equação 14) (cujos

parâmetros são apresentados na Tabela 2) para simular os dados de entrada, ambos mostrados na Figura 5.

$$C_e(t) = a_0 + a_1t + a_2t^2 + a_3t^3 + a_4t^4 + a_5t^5 + a_6t^6 + a_7t^7 + a_8t^8 \quad (14)$$

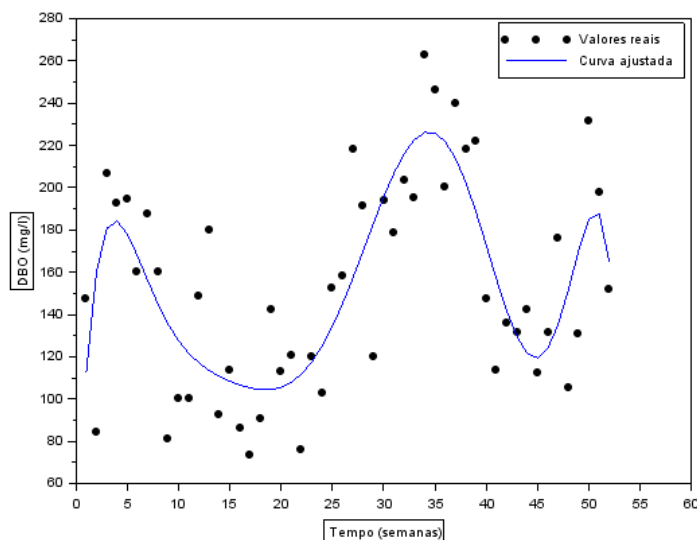


Figura 5–Dados de entrada ajustados

Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 2 – Coeficientes do polinômio de 8º grau

$a_0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_7$	$a_8$
23,18	116,47	-30,32	3,661	-0,246	0,0096	-0,0002	$26 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-10}$

Fonte: Elaborado pelo autor

## 5.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA

O período de tempo que foi utilizado na resolução numérica do problema direto foi o intervalo de 1 à 52 semanas (período de dados apresentado na Figura 3, compreendendo as amostragem de janeiro de 2004 a junho de 2005).

Para a resolução da equação (3), foi analisado o tempo computacional para execução do problema direto, com os métodos de Runge-Kutta até a quarta ordem, visto

que esse tempo deve ser reduzido, considerando as várias execuções do PD no Problema Inverso.

Dada uma equação diferencial ordinária com uma condição inicial:

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = f(t, C) \\ C(t_0) = C_0 \end{cases} \quad (15)$$

Se não for possível resolvê-la analiticamente, podemos usar os métodos numéricos, destacando os métodos de Runge-Kutta, encontram-se em Barroso *et al.* (1987).

O método de Runge-Kutta de primeira ordem, também conhecido como método de Euler, considera:

$$C_1 = C_0 + hf(t_0, C_0) \quad (16)$$

Com  $h = t_1 - t_0$ , distâncias entre os pontos  $t_i$  do intervalo de solução.

De modo geral, a equação pelo método de Euler é:

$$C_{i+1} = C_i + hf(t_i, C_i) \quad (17)$$

Para o método de Runge-Kutta de segunda ordem, também chamado de Euler Modificado, têm-se:

$$\begin{cases} k_1 = f(t_i, C_i) \\ k_2 = f(t_i + \frac{h}{2}, C_i + \frac{h}{2}k_1) \\ C_{i+1} = C_i + hk_2 \end{cases} \quad (18)$$

Há diferentes formatos para o método de segunda ordem de RK.

Para o método de terceira ordem de RK, têm-se a seguinte discretização:



$$\begin{cases} k_1 = f(t_i, C_i) \\ k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, C_i + \frac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 = f(t_i + h, C_i + 2hk_2 - hk_1) \\ C_{i+1} = C_i + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \end{cases} \quad (19)$$

E o método de R.K. de quarta ordem é:

$$\begin{cases} k_1 = f(t_i, C_i) \\ k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, C_i + \frac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, C_i + \frac{h}{2}k_2\right) \\ k_4 = f(t_i + h, C_i + hk_3) \\ C_{i+1} = C_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases} \quad (20)$$

Para a análise de malha, o problema direto foi executado com a taxa de reação  $r$  constante para cada número de pontos  $n$  de cada malha  $m=1, 2, 3, \dots, 81$ . Com a malha inicial  $m = 1$  de 53 pontos, acrescentado 13 pontos para a malha posterior. Em cada execução foram escolhidos os tempos  $t_j = 13, 25$  e  $37$  semana, para o cálculo das diferenças percentuais médias,  $D$ , de acordo com a equação (21).

$$D_m = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \left( \frac{C(t_j)^{m+1} - C(t_j)^m}{C(t_j)^{m+1}} \right) * 100 < 0,001 \quad (21)$$

Onde,

$C(t_j)^m$  é a DBO no tempo  $t_j$  para a malha  $m$ , mg/l;

$t_j$  é o tempo 13, 25 ou 37;

$m$  é o número da malha.

A diferença percentual 0,001 % foi arbitrada, considerando o valor máximo da DBO, que é de 280 mg/l. Isso significa que o erro máximo, devido à escolha de malha, é da ordem de 0,0028 mg/l, o qual é menor que a incerteza das medidas efetuadas nos dados experimentais de Sezerino (2006), onde a média do efluente da lagoa anaeróbia foi 151,13 mg/l com desvio padrão de 50,62 mg/l; média do efluente da lagoa facultativa 109,44

mg/l e desvio padrão de 60,17 mg/l; média do efluente do *wetlands* 42,29 mg/l com desvio padrão de 24,01 mg/l. Com um erro padrão máximo de 10 mg/l.

A Tabela 3 apresenta os números de pontos mínimos para a condição dada na equação (21) e os respectivos tempos de execução computacional, para os quatro métodos numéricos considerados.

Tabela 3 – Comparação entre os Métodos Numéricos

Método Numérico	Euler	R. K. 2	R. K. 3	R. K. 4
Número de pontos	599	560	560	560
Tempo computacional (segundos)	0,022	0,022	0,028	0,034

Fonte: Elaborado pelo autor

Os métodos testados não apresentam diferenças significativas no tempo de execução, provavelmente devido à simplicidade das equações do Problema Direto. O Método de Euler exigiu a maior malha – e por isso poderia ser mais lento –, porém a discretização das equações diferenciais possui menos operações do que os demais, explicando o reduzido tempo de execução computacional. Considerando o tempo de execução, qualquer um dos métodos poderia ser usado no Problema Inverso, com rendimento semelhante. Assim, adotou-se a malha de 560 pontos e o Método de Runge-Kutta de segunda ordem para a resolução do Problema Inverso, pois para esse método a malha é menor do que para o Método de Euler.

Para a solução do sistema apresentado na equação (3), soluções analíticas podem se tornarem inviáveis, dependendo das funções  $r(t)$  e  $Ce(t)$ . Devido a resolução do Problema Inverso (PI), torna-se adequado utilizar o Método Numérico com menor tempo de execução computacional. Após a escolha do método numérico da Tabela 3, o PI foi resolvido utilizando o Algoritmo de Procura em Rede, Borges *et al.* (2018), com os seguintes passos (para a estimação de dois parâmetros  $a$  e  $b$ ):

- a) Determinar os intervalos de existência de solução dos coeficientes  $a = [a_{min}, a_{max}]$  e  $b = [b_{min}, b_{max}]$ ;

- b) Dividir o intervalo  $a$  em  $n$  partes, com  $n+1$  pontos, obtendo o vetor  $A(i)$  com  $i = 1, 2, 3, \dots, n+1$ ; e o intervalo  $b$  em  $m$  partes, com  $m+1$  pontos, obtendo o vetor  $B(j)$  com  $j = 1, 2, 3, 4, \dots, m+1$ .
- c) Com a Eq. 3, calcular  $C_k(t)$ , para  $k = 1, 2$ ; usando o par  $x = (A(i), B(j))$  como coeficientes. Encontrar a diferença  $d_l$  entre os dados reais  $C_d$  e os resultados  $C_k(t)$ ;  $d_l = |C_k(t_l) - C_d(t_l)|$ ,  $l = 1, 2, 3, \dots, s$ , sendo  $s$  o número de dados experimentais.
- d) Executar o programa incrementando  $i$  no passo  $c$  até  $n+1$ , para cada  $i$ , faz-se  $j$  variar de 1 até  $m+1$ .
- e) Encontrar o menor erro  $E_{ij}$  correspondente ao par  $(a(i), b(i))$ , entre os valores calculados  $(n+1)(m+1)$ .
- f) O par encontrado no passo  $e$ , representa os parâmetros ótimos para o modelo matemático.

## 6. ANÁLISE DA APLICAÇÃO DO MODELO

Uma breve descrição da aplicação do Método de Procura em Rede e a discussão sobre a eficiência do modelo proposto na tarefa de descrever os dados experimentais são apresentadas nesse capítulo

### 6.1 SOBRE O PROBLEMA INVERSO

O Método de Procura em Rede foi aplicado com partição de 201 pontos para cada parâmetro  $a$  e  $b$  das funções rendimento  $r(t)$ . Cada execução computacional utilizou em torno de  $11,2 s$ , com malha de 560 pontos e PD resolvido pelo Método de R.K. de segunda ordem.

Para cada execução do PI, o aumento no número de divisões dos intervalos, além de 201 divisões, não implicou em melhoria do coeficiente de determinação, com isto foram adotados os resultados descritos no item 6.2. Devido ao Método de Procura em Rede ser sub-ótimo, deve-se considerar a possibilidade de que existem outras soluções, porém, pelos testes realizados, não devem apresentar parâmetros muito diferentes dos encontrados nesse trabalho.

### 6.2 SOBRE A EFICIÊNCIA DO MODELO PARA PREDIZER OS DADOS EXPERIMENTAIS

Para verificar o comportamento do modelo perante os dados, foi variada a função  $r(t)$  do sistema de equações (3).

I - Considerando a função  $r(t)$  uma função constante,  $r(t) = k$ , com  $k \in \mathbb{R}$ , foram obtidos os resultados apresentados na Figura 6 e Tabela 4:

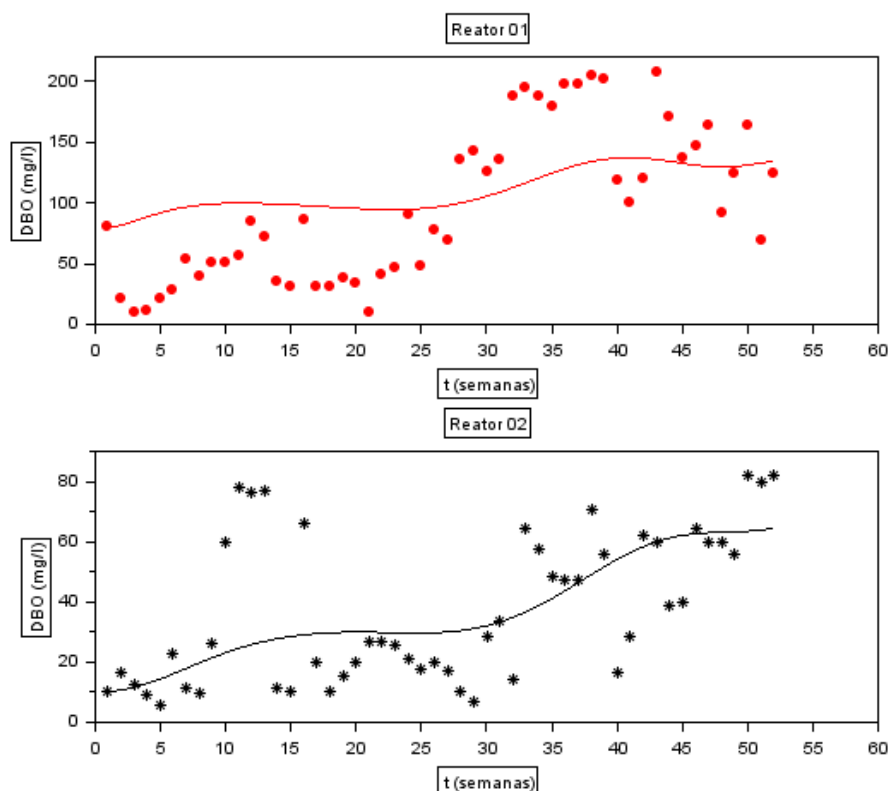


Figura 6 – Taxa de reação constante

Fonte: Elaborado pelo Autor

Tabela 4 – Parâmetros determinados, função constante

REATOR 01		REATOR 02	
$k_1$ mínimo	0	$k_2$ mínimo	0
$k_1$ máximo	5	$k_2$ máximo	12
$k_1$ ótimo	1,025	$k_2$ ótimo	9,06
Número de divisões	201	Número de divisões	201
Coeficiente de determinação	0,3191	Coeficiente de determinação	0,3518

Fonte: Elaborado pelo autor

O aumento no número de divisões, não apresentava melhoras significativas no coeficiente de determinação. Este por sua vez, manteve-se baixo, mas visualizando graficamente, as curvas soluções possuem uma tendência de acompanhar o movimento dos dados reais.

II - Considerando a função  $r(t) = aC(t) + b$ , com  $a, b \in \mathbb{R}$ , foram obtidos os resultados apresentados na Figura 7 e Tabela 5.

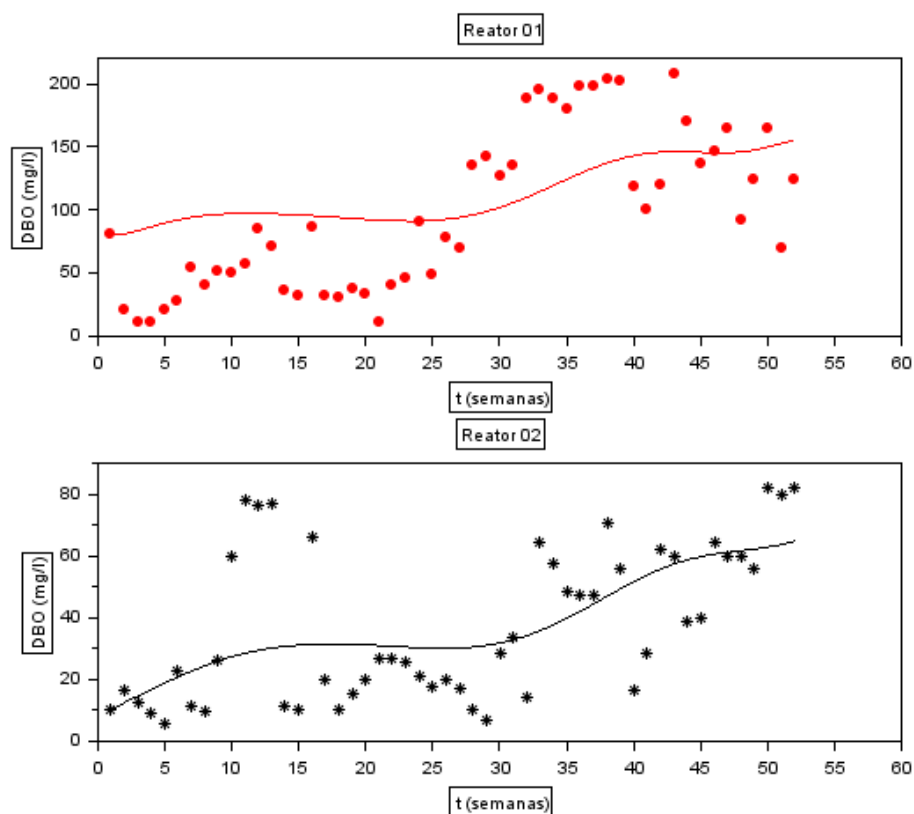


Figura 7 – Taxa de reação variável, utilizando função afim

Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 5 – Valores encontrados para função afim

REATOR 01		REATOR 02	
$a_1$ mínimo	-1	$a_2$ mínimo	-1
$a_1$ máximo	1	$a_2$ máximo	1
$a_1$ ótimo	-0,04	$a_2$ ótimo	0,08
Número de divisões	51	Número de divisões	51
$b_1$ mínimo	0	$b_2$ mínimo	0
$b_1$ máximo	10	$b_2$ máximo	10
$b_1$ ótimo	5	$b_2$ ótimo	6,2
Número de divisões	51	Número de divisões	51
Coeficiente de determinação	0,3339	Coeficiente de determinação	0,3868

Fonte: Elaborado pelo autor

Nesta simulação, foi obtido o melhor coeficiente de determinação, comparando com as simulações I, III e IV.

III - Considerando a função  $r(t)$  uma função exponencial:

$r(t) = ae^{bc(t)}$ , com  $a, b \in \mathbb{R}$ , foram obtidos os resultados apresentados na Figura 8 e Tabela 6.

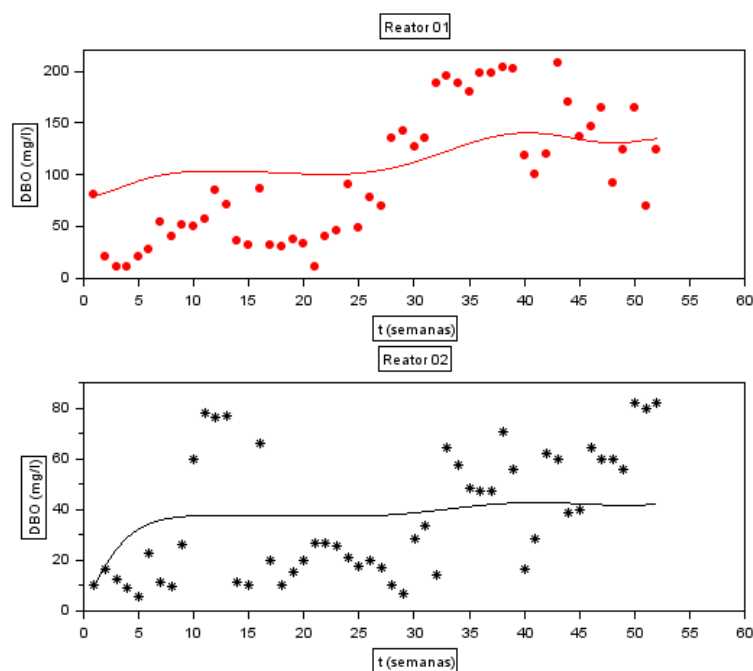


Figura 8 – Taxa de reação variável, função exponencial

Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 6 – Parâmetros encontrados para função exponencial

REATOR 01		REATOR 02	
$a_1$ mínimo	-1	$a_2$ mínimo	-1
$a_1$ máximo	1	$a_2$ máximo	1
$a_1$ ótimo	0,08	$a_2$ ótimo	0,44
Número de divisões	51	Número de divisões	51
$b_1$ mínimo	0	$b_2$ mínimo	-1
$b_1$ máximo	1	$b_2$ máximo	1

$b_1$ ótimo	0,02	$b_2$ ótimo	0,08
Número de divisões	51	Número de divisões	51
Coeficiente de determinação	0,3002	Coeficiente de determinação	0,1665

Fonte: Elaborado pelo autor

A simulação com a função exponencial apresentou o menor coeficiente de determinação de todas as funções avaliadas.

IV - Considerando a função  $r(t)$  uma função logarítmica:

$r(t) = b * \log(a * C(t))$ , com  $a, b \in \mathbb{R}$ , foram obtidos os resultados apresentados na Figura 9 e Tabela 7.

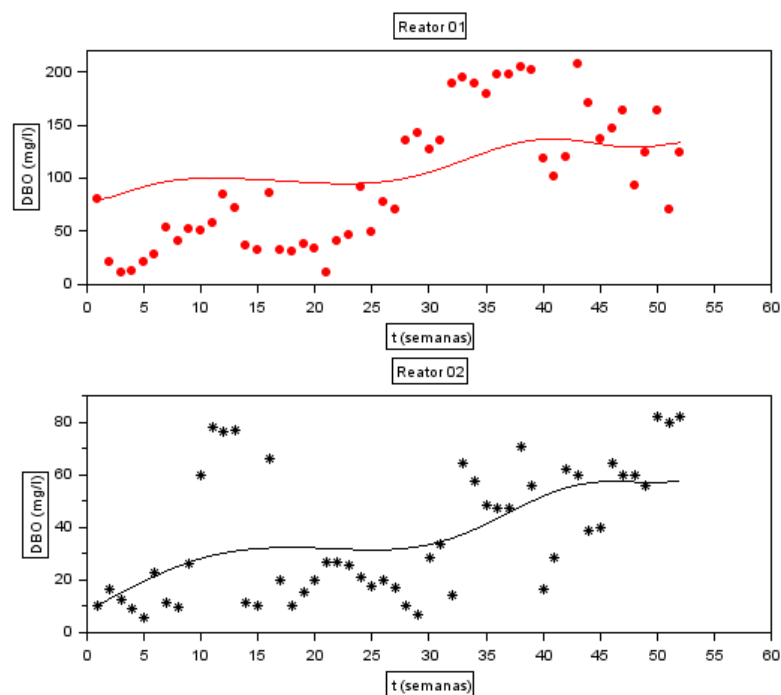


Figura 9 – Taxa variável, função logaritmo

Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 7 – Coeficientes encontrados para função logaritmo

REATOR 01		REATOR 02	
$a_1$ mínimo	0	$a_2$ mínimo	0



$a_1$ máximo	3	$a_2$ máximo	5
$a_1$ ótimo	1,68	$a_2$ ótimo	2,7
Número de divisões	51	Número de divisões	51
$b_1$ mínimo	0	$b_2$ mínimo	-10
$b_1$ máximo	10	$b_2$ máximo	10
$b_1$ ótimo	0,2	$b_2$ ótimo	2
Número de divisões	51	Número de divisões	51
Coeficiente de determinação	0,3174	Coeficiente de determinação	0,3639

Fonte: Elaborado pelo autor

A simulação com a função logarítmica ficou com coeficiente de determinação entre as funções constante e função afim.

## 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Analisando os resultados apresentados pode-se considerar que:

- a) Há uma grande dispersão dos dados experimentais, provavelmente ocasionada por variáveis não contempladas no modelo, tais como chuva, temperatura, umidade do ar, radiação solar, entre outros;
- b) As curvas de DBO geradas pelo modelo não descrevem em detalhe essa dispersão dos dados, mas descrevem a tendência desses de modo geral. Talvez, em experimentos em que aquelas variáveis mencionadas em (a) fossem monitoradas, houvesse uma melhor descrição dos dados experimentais;
- c) As curvas de DBO geradas pelo modelo mostram uma certa coerência (semelhança) entre as condições de entrada do primeiro reator, e as condições de saída do segundo reator.
- d) Percebe-se que comparando a taxa de reação constante, Tabela 4, com a taxa de variação variável, Tabela 5, os coeficientes de determinação da taxa de reação ajustada por uma função afim, apresentam alguns décimos melhores, ou seja, pode-se atribuir a taxa de reação variável de acordo com a concentração da substância.

De modo geral, mesmo com as limitações mencionadas, o modelo mostrou-se eficiente, como uma primeira tentativa de descrever o sistema de reatores. Futuros trabalhos podem considerar tanto o melhoramento do modelo, incluindo os termos de evaporação e infiltração no reator *wetlands*, como a obtenção de dados experimentais sem influência de fatores não considerados no modelo.

## REFERÊNCIAS

BARROSO, L. C. et al. **Cálculo Numérico: com aplicações**. 2. ed. São Paulo: Harbra, 1987.

BORGES, P. A. P. et al. Determinação de Parâmetros em Modelos Matemáticos de Reatores Anaeróbios. **Proceeding Series Of The Brazilian Society Of Applied And Computational Mathematics**, [s.l.], 14 fev. 2018. SBMAC. <http://dx.doi.org/10.5540/03.2018.006.01.0350>.

BORGES, P. A. P ; CERVI, A. ; VIONE, M.T. Determinação dos parâmetros da equação de Van Genutchen usando problema inverso em um problema de evaporação. **In: VIII ERMAC 2008**, Pelotas, v. 1. p. 23-30, 2008.

BASSANEZI, R. C. **Ensino-aprendizagem com modelagem matemática, uma nova estratégia**. São Paulo: Contexto, 2002.

CERVI, Angéli. **Determinação dos parâmetros da equação característica de solos através da técnica de solução de problemas inversos com base em dados de evaporação**. 2009. 102 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática). Universidade Regional do Rio Grande do Sul – UNIJUÍ. Ijuí, 2009.

FERNANDES, Carlos. **Caracterização de esgotos sanitários**. 2000. Disponível em: <[http://www.dec.ufcg.edu.br/saneamento/ES00\\_00.html?submit=%CDndica+de+Es+gotos+Sanit%rios](http://www.dec.ufcg.edu.br/saneamento/ES00_00.html?submit=%CDndica+de+Es+gotos+Sanit%rios)>. Acesso em: 15 out. 2017.

IAQUELI, André Luiz. **Wetlands construídos: aplicações, benefícios e vantagens do sistema**. 2016. Disponível em: <<https://www.tratamentodeagua.com.br/artigo/wetlands-construidos-aplicacoes-beneficios-e-vantagens/>>. Acesso em: 18 out. 2017.

KADLEC, R. H.; WALLACE, S. D. **Treatment wetlands**. Florida: CRC Press, 2 ed. 2008.

PILLOTO, Juliana Seixas. **Contribuições para modelagem matemática do comportamento dos tanques sépticos para a remoção de matéria orgânica**. 2004. 187 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2004.

PHILIPPI, L. S.; SEZERINO, P. H. **Aplicação de sistemas tipo wetlands no tratamento de águas residuárias: Utilização de filtros plantados com macrófitas**. Florianópolis: Edição do Autor, 2004.

SEZERINO, Pablo Heleno. **Potencialidade dos filtros plantados com macrófitas (constructed wetlands) no pós-tratamento de lagoas de estabilização sob condições de clima subtropical**. 2006. 171 f. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006.

SOUSA, J. T. et al. Utilização de wetland construído no pós-tratamento de esgotos domésticos pré-tratados em reator UASB. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, Rio de Janeiro, v. 9, n. 4, p.285-290, out./dez. 2004.

VON SPERLING, M. **Estudos e modelagem da qualidade da água de rios**. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental - Ufmg, 2007.

VON SPERLING, M. **Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos**. 3. ed. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental - Ufmg, 2005.

ZILL, D. G. **Equações Diferenciais: com aplicações em modelagem**. 10. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2016.